

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ  
Директор по образовательной  
деятельности

\_\_\_\_\_ С.Т. Князев  
«\_\_» \_\_\_\_\_

### РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1161428	Современные теоретические представления химии и аттестации материалов

Екатеринбург

<b>Перечень сведений о рабочей программе модуля</b>	<b>Учетные данные</b>
<b>Образовательная программа</b> 1. Химия и физика новых функциональных материалов	<b>Код ОП</b> 1. 04.04.02/33.01
<b>Направление подготовки</b> 1. Химия, физика и механика материалов	<b>Код направления и уровня подготовки</b> 1. 04.04.02

Программа модуля составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Емельянова Юлия Валерьевна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	аналитической химии и химии окружающей среды
2	Лакиза Наталья Владимировна	кандидат химических наук, доцент	Доцент	аналитической химии и химии окружающей среды
3	Лебедева Елена Леонидовна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	аналитической химии и химии окружающей среды
4	Русинова Елена Витальевна	доктор химических наук, доцент	Профессор	органической химии и высокомолекулярных соединений
5	Сафронов Александр Петрович	доктор физико-математических наук, профессор	профессор	департамент фундаментальной и прикладной химии

**Согласовано:**

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

# 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ **Современные теоретические представления химии и аттестации материалов**

## 1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль предназначен для выбора студентами и состоит из дисциплин: «Математическая обработка результатов измерений», «Квантовая химия», «Химия металлоорганических и гибридных материалов», «Современные спектроскопические методы». Рекомендован для изучения студентами с базовой химической подготовкой. Целью модуля является формирование у студентов представления о математических моделях и методах обработки результатов измерений; знаний о теоретических основах строения вещества, принципах описания химической связи. Модуль знакомит с фундаментальной теорией химии и дает необходимую теоретическую базу для понимания и освоения квантовохимических расчетов и методов исследования химических систем, с теоретическими представлениями об органических, неорганических и металлоорганических материалах, современными спектроскопическими методами, включая АЭС, ААС и ИК-спектроскопию.

## 1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Современные спектроскопические методы	3
2	Химия металлоорганических и гибридных материалов	3
3	Квантовая химия	3
4	Математическая обработка результатов измерений	3
ИТОГО по модулю:		12

## 1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	Не предусмотрены
Постреквизиты и кореквизиты модуля	Не предусмотрены

## 1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
---------------------------	--------------------------------	--

1	2	3
Квантовая химия	<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе</p>
	<p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</p>	<p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p>
Математическая обработка результатов	<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области</p>

измерений	<p>прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе</p>
	<p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p>
Современные спектроскопические методы	<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием</p>

		<p>соответствующих целям подходов и методов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
	<p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</p>	<p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p>
<p>Химия металлорганических и гибридных материалов</p>	<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p>

		<p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе</p>
	<p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</p>	<p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p>

### 1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Современные спектроскопические методы**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Емельянова Юлия Валерьевна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	аналитической химии и химии окружающей среды
2	Лакиза Наталья Владимировна	кандидат химических наук, доцент	Доцент	аналитической химии и химии окружающей среды

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики**

Протокол № 2 от 30.01.2023 г.



# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Емельянова Юлия Валерьевна, Доцент, аналитической химии и химии окружающей среды
- Лакиза Наталья Владимировна, Доцент, аналитической химии и химии окружающей среды

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Основы спектроскопии	История развития спектроскопии. Электромагнитное излучение. Спектр электромагнитного излучения. Классификация спектроскопических методов анализа.
2	Методы молекулярной спектроскопии	Основы молекулярной спектроскопии. Классификация методом молекулярной спектроскопии. Молекулярные спектры. Аппаратура для молекулярной спектроскопии. Источники излучения. Анализаторы частоты. Детекторы излучения. Теоретические основы вращательной, колебательной и электронной спектроскопии.
3	Методы атомной спектроскопии	Введение в атомную спектроскопию (Преимущества атомной спектроскопии. Взаимосвязь спектроскопических методов и областей электромагнитного спектра). Взаимодействия электромагнитного излучения с веществом (Типы спектров. Интенсивность атомных спектральных линий. Ширина спектральной линии. Причины уширения). Аппаратура в оптической спектроскопии (Источник излучения. Монохроматоры. Характеристики спектральных приборов. Приемники излучения). Методы атомной спектроскопии (Атомная эмиссионная спектроскопия. Атомно-абсорбционная спектроскопия). Практическое применение ААС и АЭС.

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Современные спектроскопические методы

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Бёккер, Ю., Ю.; Спектроскопия : монография.; РИЦ Техносфера, Москва; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=88994> (Электронное издание)
2. Фомин, Д. В.; Учебно-методическое пособие по выполнению расчетно-графической работы по теме: электронная оже-спектроскопия : методическое пособие.; Директ-Медиа, Москва, Берлин; 2015; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=278996> (Электронное издание)
3. Ельяшевич, М. А.; Атомная и молекулярная спектроскопия : монография.; Государственное издательство физико-математической литературы, Москва; 1962; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=474125> (Электронное издание)
4. Зайдель, А. Н.; Спектроскопия вакуумного ультрафиолета : монография.; Наука, Москва; 1967; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=474126> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Смит, А. Л., Мальцев, А. А., Тарасевич, Б. Н.; Прикладная ИК-спектроскопия. Основы, техника, аналитическое применение; Мир, Москва; 1982 (6 экз.)
2. Штерн, Э., Тиммонс, К., Иванова, Т. М., Пентина, Ю. А.; Электронная абсорбционная спектроскопия в органической химии; Мир, Москва; 1974 (5 экз.)
3. Ельяшевич, М. А., Грибов, Л. А.; Атомная и молекулярная спектроскопия. Молекулярная спектроскопия; КомКнига, Москва; 2007 (3 экз.)
4. Ельяшевич, М. А.; Атомная и молекулярная спектроскопия; Эдиториал УРСС, Москва; 2001 (1 экз.)
5. Шмидт, Шмидт В., Савилов, С. В., Ивановская, Н. П.; Оптическая спектроскопия для химиков и биологов; Техносфера, Москва; 2007 (10 экз.)
6. Беккер, Ю., Казанцева, Л. Н., Пупышев, А. А., Полякова, М. В.; Спектроскопия; Техносфера, Москва; 2009 (5 экз.)
7. Миронов, В. А.; Спектроскопия в органической химии : сборник задач.; Химия, Москва; 1985 (21 экз.)
8. Вилков, Л. В., Пентин, Ю. А.; Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия : Учебник для вузов.; Высшая школа, Москва; 1987 (11 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

<http://e.lanbook.com/>

<http://elibrary.ru>

<http://www.reaxys.com>

<http://www.sciencedirect.com/>

<https://link.springer.com/>

### Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

### Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

<https://docs.cntd.ru/>

<https://www.google.com/>

<https://scholar.google.com/>

## 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Современные спектроскопические методы

### Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
2	Лабораторные занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acadmс Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
5	Самостоятельная работа студентов	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов	Не требуется

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Химия металлорганических и гибридных**  
**материалов**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Русинова Елена Витальевна	доктор химических наук, доцент	Профессор	органической химии и высокомолекуляр ных соединений

**Рекомендовано учебно-методическим советом института** Естественных наук и математики

Протокол № 2 от 30.01.2023 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Русинова Елена Витальевна, Профессор, органической химии и высокомолекулярных соединений

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Восстановление ионов металлов в полимерных матрицах как конденсационный метод синтеза нанокompозитов.	Основные представления о формировании наночастиц при химическом восстановлении. Химические методы восстановления.  Методы электрохимического восстановления.
2	Физико-химические методы получения нанокompозитов.	Синтез нанокompозитов под действием микроволнового излучения. Фотохимическое восстановление. Радиационно-химическое восстановление. Сонохимическое восстановление.  Физическое и химическое осаждение из газовой фазы.
3	Нанокompозиты, сформированные в ходе золь-гель процессов.	Общая характеристика золь-гель реакций. Сочетание реакций полимеризации и золь-гель синтеза нанокompозитов in situ. Формирование неорганического прекурсора в присутствии органических полимеров. Полимерный золь-гель синтез. Гибридные нанокompозиты на основе гетероэлементной оксид/оксидной керамики. Морфология и фрактальные модели гибридных нанокompозитов.
4	Физико-химия интеркалированных наносистем.	Состав, структура и интеркаляционные свойства слоистых материалов. Общая характеристика интеркалированных систем. Специфика полимеризации мономеров во внутрислоевом пространстве. Гибридные нанокompозиты, получаемые прямым интеркалированием макромолекул в слою “хозяина”. Супрамолекулярная сборка в нанослоистых материалах. Структура нанокompозитов внедрения

		халькогенид металла – полимер. Структура нанокompозитов внедрения халькогенид металла – полимер.
5	Элементоорганические гибридные нанокompозиты на основе фенолформальдегидной смолы и диоксида кремния.	Приготовление гибридных керамеров. Схема реакции. Экспериментальные методы исследования композитов. Термические, морфологические, механические характеристики гибридов. Исследования на горючесть и огнестойкость.
6	Магнитные полимерные нанокompозиты (МПН).	Классификация МПН. Методы синтеза МПН. Методы изучения характеристик МПН. Магнитные свойства.

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

### 1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Химия металлоганических и гибридных материалов

#### Электронные ресурсы (издания)

1. , Грахов, А. Е., Ю-Винг, М., Жонг-Женг, Ю.; Полимерные нанокompозиты : монография.; РИЦ Техносфера, Москва; 2011; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=115690> (Электронное издание)
2. ; Дисперсно-наполненные полимерные нанокompозиты : монография.; Казанский научно-исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань; 2012; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=258354> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. , Виноградов, В. М., Кербер, М. А., Головкин, Г. С., Берлин, А. А.; Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технологии : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности "Технол. перераб. пласт. масс и эластомеров".; Профессия, Санкт-Петербург; 2008 (13 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Не используются

#### Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

#### Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

### 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### Химия металлоорганических и гибридных материалов

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
5	Самостоятельная работа студентов	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов	Не требуется



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Квантовая химия**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Сафронов Александр Петрович	доктор физико- математических наук, профессор	профессор	департамент фундаментальной и прикладной химии

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики**

Протокол № 2 от 30.01.2023 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Сафронов Александр Петрович, профессор, департамент фундаментальной и прикладной химии

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Теория симметрии молекул	Геометрия молекул, химические связи и валентные углы. Конфигурация молекулы, ее предсказание на основании теории гибридизации и отталкивания электронных пар. Конформация молекулы. Внутреннее вращение, потенциальный барьер перехода между конформациями. Симметрия молекул. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представление операций симметрии. Неприводимые представления. Характеры представлений, таблицы характеров. Полное представление симметрии, его характер. Разбиение полного представления на неприводимые. Учет симметрии молекул при рассмотрении их физических свойств. Колебания сложных молекул. Нормальные колебания, их симметрия. Анализ нормальных колебаний с помощью таблицы характеров. Методы наблюдения колебаний молекул – инфракрасная спектроскопия и комбинационное рассеяние света. Правила отбора нормальных колебаний в инфракрасном спектре и спектре комбинационного рассеяния. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, разрешенные по симметрии линейные комбинации АО. Использование теории симметрии для определения вида МО. Полное представление симметрии линейных комбинаций АО. Проекционный оператор, определение вкладов АО в молекулярные. Правила отбора в электронных спектрах поглощения. Полная волновая

		<p>функция электронной конфигурации молекулы, ее симметрия. Интеграл момента перехода и его компоненты.</p>
2	<p>Приближенные методы квантовой химии</p>	<p>Электронное строение сложных молекул. Варианты расчетной реализации метода Рутана. Базис решения. Слейтеровские и гауссовы орбитали, их особенности. Оптимизация геометрии стационарного состояния молекул в рамках квантовых расчетов. Электронные конфигурации молекул, конфигурационное взаимодействие.</p> <p>Приближенные методы расчета молекулярных орбиталей сложных молекул. Методы нулевого дифференциального перекрывания, полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием, их связь с методом Рутаана.. Семейство методов CNDO, их вычислительные особенности и возможности. Расчетные полуэмпирические методы М.Дьюара: MINDO/3, MNDO, PM3. Сравнительный анализ различных вариантов расчетных методов. Расчет энергии основных и возбужденных электронных состояний, энергии перехода между ними. Интерпретация и предсказание молекулярных электронных спектров. Вычисление молекулярных постоянных, дипольных и квадрупольных моментов, оценка магнитных свойств.</p> <p>Метод молекулярной механики, его основные особенности. Оптимизация геометрической структуры молекул в методе молекулярной механики. Использование компьютеров для расчета электронного строения молекул. Основные пакеты прикладных программ для персональных компьютеров, их особенности и возможности. Прикладной пакет полуэмпирических расчетов МОРАС. Внутренние координаты молекулярной системы. Структура Z-матрицы геометрической структуры молекулы.</p>
3	<p>Теоретическое описание взаимодействия молекул</p>	<p>Квантово-химическое описание химических реакций. Поверхность потенциальной энергии. Качественные характеристики поверхностей потенциальной энергии и их сечений. Использование классических траекторий на поверхности потенциальной энергии. Переходное состояние. Реакции в пределах одной поверхности. Симметрия реагентов и продуктов реакции. Корреляционные правила. Влияние симметрии геометрической конфигурации на свойства и реакционную способность органических соединений. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях. Правила Вудворда-Хоффмана. Границы применения принципов сохранения орбитальной симметрии.</p> <p>Общность физической природы внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий. Приближенные методы описания межмолекулярных взаимодействий. Применение метода возмущений для описания межмолекулярных взаимодействий. Дисперсионные, индукционные и ориентационные взаимодействия. Силы Ван-дер-Ваальса. Потенциальные функции парных межмолекулярных взаимодействий. Функции Леннарда-Джонса и Борна-Майера. Специфические межмолекулярные взаимодействия. Понятие электроно-донорноакцепторного взаимодействия. Типы</p>

		доноров и акцепторов. Водородная связь, ее специфические особенности. Экспериментальное наблюдение электроно-донорноакцепторных взаимодействий. Донорные и акцепторные числа. Квантово-механические и статистические подходы к описанию межмолекулярных взаимодействий.
--	--	---

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Квантовая химия

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Громова, Е. Ю.; Строение атома. Химическая связь : учебное пособие.; Казанский научно-исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань; 2017; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=500901> (Электронное издание)
2. Грей, Г., Г., Дяткина, М. Е.; Электронная и химическая связь : учебное пособие.; Мир, Москва; 1967; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=222465> (Электронное издание)
3. Герцберг, Г., Г., Кондратьев, В. Н.; Спектры и строение двухатомных молекул; Изд-во иностр. лит., Москва; 1949; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=255713> (Электронное издание)
4. Крашенинин, В. И.; Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие.; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2012; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Степанов, Н. Ф.; Квантовая механика и квантовая химия : [Учеб. для вузов].; Мир, Москва; 2001 (71 экз.)
2. Степанов, Н. Ф.; Квантовая механика молекул и квантовая химия : учебное пособие для химических специальностей вузов.; Издательство Московского университета, Москва; 1991 (36 экз.)

### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Не используются

### Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

### Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

### 3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### Квантовая химия

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
2	Лабораторные занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
5	Самостоятельная работа студентов	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов	Не требуется

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Математическая обработка результатов**  
**измерений**

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия Имя Отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
1	Лебедева Елена Леонидовна	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	аналитической химии и химии окружающей среды

**Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики**

Протокол № 2 от 30.01.2023 г.

# 1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Лебедева Елена Леонидовна, Доцент, аналитической химии и химии окружающей среды

## 1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
  - Базовый уровень

*\*Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

*Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.*

## 1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Элементы теории измерений	Физические величины. Единицы величин. Международная система единиц. Измерение. Погрешности измерений. Средства измерений. Методики измерений.
2	Точность результатов измерений	Понятие точности результатов измерений и её составляющие. Способы выражения точности – погрешность и неопределённость, методы их оценки. Источники погрешностей при химических измерениях.
3	Элементы математической статистики	Генеральная совокупность и выборка. Статистические модели. Случайные величины и некоторые виды их распределений. Сравнение дисперсий нескольких выборок. Проверка гипотезы о равенстве математических ожиданий. Сложение погрешностей.
4	Корреляционный и регрессионный анализ	Корреляция и ковариация. Линейная регрессия. Метод наименьших квадратов. Нелинейные и многомерные регрессии. Метод проекции на латентные структуры.
5	Планирование эксперимента	Поиск оптимальных условий. Одно- и многофакторные эксперименты.
6	Методики количественного химического анализа (МКХА)	Показатели качества МКХА. Разработка и аттестация МКХА. Применение МКХА в лабораториях. Внутрिलाбораторный контроль качества результатов измерений. Представление результатов измерений.

### 1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

## 2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Математическая обработка результатов измерений

#### Электронные ресурсы (издания)

1. Ананьев, В. А.; Анализ экспериментальных данных : учебное пособие. 1. ; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232208> (Электронное издание)
2. Юдин, Ю. В., Попова, А. А.; Организация и математическое планирование эксперимента : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018; <http://www.iprbookshop.ru/106473.html> (Электронное издание)
3. Шурыгина, Л. И.; Методы оптимизации химического эксперимента : учебное пособие. II. Регрессионный анализ и статистическое планирование эксперимента; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2011; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232735> (Электронное издание)
4. Назина, Л. И.; Планирование и организация эксперимента: лабораторный практикум : практикум.; Воронежский государственный университет инженерных технологий, Воронеж; 2019; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=601551> (Электронное издание)
5. Осипенко, С. А.; Статистические методы обработки и планирования эксперимента : учебное пособие.; Директ-Медиа, Москва, Берлин; 2020; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=598682> (Электронное издание)
6. Медведев, П. В.; Математическая обработка результатов исследования : учебное пособие.; Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, Оренбург; 2017; <http://www.iprbookshop.ru/78785.html> (Электронное издание)

#### Печатные издания

1. Смагунова, А. Н.; Методы математической статистики в аналитической химии : учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 - химия и по направлению 020100.62 - химия.; Феникс, Ростов-на-Дону; 2012 (75 экз.)
2. Чарыков, А. К.; Математическая обработка результатов химического анализа. Методы обнаружения и оценки ошибок : для хим. специальностей вузов.; Химия. Ленинградское отделение, Ленинград; 1984 (42 экз.)
3. Рего, К. Г.; Метрологическая обработка результатов технических измерений : Справ. пособие.; Техника, Киев; 1987 (12 экз.)
4. Степанова, Е. А., Степанова, Е. А.; Основы обработки результатов измерений : [учебное пособие для студентов, обучающихся по программе бакалавриата по направлениям подготовки 27.03.01 "Стандартизация и метрология", 28.03.01 "Нанотехнология микросистемная техника", 03.03.02 "Физика".; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2014 (98 экз.)

#### Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы



Электронно-библиотечная система "Лань" <https://e.lanbook.com/>

Техэксперт (Кодекс) <http://sk5-410-lib-te.at.urfu.ru/docs/>

ФГИС "АРШИН" <https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry>

### **Материалы для лиц с ОВЗ**

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

### **Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы**

<https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry>

<https://www.google.com/>

<https://scholar.google.com/>

## **3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Математическая обработка результатов измерений**

#### **Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением**

Таблица 3.1

<b>№ п/п</b>	<b>Виды занятий</b>	<b>Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>	<b>Перечень лицензионного программного обеспечения</b>
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES

		Доска аудиторная	
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES
5	Самостоятельная работа студентов	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES